

29^{èmes} Journées Internationales Huiles Essentielles & Extraits DIGNE LES BAINS – 24 & 25 juin 2010 - Communication

Identification des chémotypes de *Ravensara aromatica* par spectrométrie proche infrarouge

Auteurs : G. Chaix¹, H. Andrianoelisoa², C. Menut³, P. Danthu⁴

¹ CIRAD, BIOS Département, TA B-40/16, 73 rue J-François Breton, 34398 Montpellier Cedex 5

² FOFIFA Département de Recherches Forestières et Piscicoles, Antananarivo, Madagascar

³ IBMM, Ecole Nat. Sup. Chimie Montp., 8 rue de l'Ecole Normale, 34296 Montpellier Cedex 5

⁴ CIRAD Madagascar, UPR 105, URP Forêts et Biodiversité, Tananarive, Madagascar

Résumé

La spectrométrie proche infrarouge (SPIR) est basée sur le principe d'absorption des rayonnements par la matière organique entre 700-2500 nm. Cette absorption est liée à la composition chimique des échantillons, cette dernière peut être estimée par la simple mesure de l'absorption par l'échantillon. Cette mesure se fait avec un spectromètre soit en « transmission » (on mesure la lumière traversant un échantillon fin ou liquide), soit en « réflexion » (on mesure la lumière réfléchie par un échantillon épais). La SPIR nécessite une phase d'étalonnage basée sur des mesures de référence obtenues au laboratoire et l'établissement de modèles de prédiction. Elle a un grand nombre d'applications dans le domaine industriel (chimie, pharmacie, agro-industries). Cet outil a été développé pour des grandeurs quantitatives et il est employé également pour des approches qualitatives (ie type classification).

Une communication distincte a montré qu'il existe chez *Ravensara aromatica*, espèce endémique de Madagascar, 5 types correspondant aux caractéristiques chimiques des feuilles : deux appartenant au groupe caractérisé par des molécules aromatiques (méthyl-chavicol, méthyl-eugénol) et trois autres d'un groupe caractérisé par des molécules terpéniques (limonène, sabinène, α -terpinène). La question ici est de savoir si la SPIR permet d'identifier ces 5 groupes chimiques.

Nous avons mesuré l'absorbance par transmission de 100 échantillons d'huiles essentielles de type connu. Les spectres moyens par type présentent des pics d'absorbance caractéristiques les rendant facilement identifiables. De ce fait, nous montrons que sur la seule base de l'information spectrale il est possible de discriminer les types chimiques de ces huiles. Nous avons également construit un étalonnage pour la quantité de certains composés chimiques, notamment la quantité de Limonène.

En second lieu, nous avons enregistré des spectres d'absorbance en réflexion sur des feuilles sèches dont le type chimique était connu. La distinction est plus difficile mais nous séparons les types à composés terpéniques des types à structures aromatiques. Pour ces derniers, nous distinguons les chémotypes à méthyl-chavicol et ceux à méthyl-eugénol. Nous avons validé ces modèles sur des échantillons indépendants.

Ces résultats offrent des perspectives de détection rapides et précoces des types chimiques de *Ravensara aromatica*. Des appareils dédiés à la SPIR sont maintenant déclinés en version portable et, dans le cadre de campagne d'aménagement, on peut envisager d'identifier au champ les types chimiques des arbres d'un terroir afin d'améliorer la production en qualité.

Identification by Near Infrared Spectroscopy of essential oil chemotypes from *Ravensara aromatica*

Authors: G. Chaix¹, H. Andrianoelisoa², C. Menut³, P. Danthu⁴

¹ CIRAD, BIOS Département, TA B-40/16, 73 rue J-François Breton, 34398 Montpellier Cedex 5

² FOFIFA Département de Recherches Forestières et Piscicoles, Antananarivo, Madagascar

³ IBMM, Ecole Nat. Sup. Chimie Montp., 8 rue de l'Ecole Normale, 34296 Montpellier Cedex 5

⁴ CIRAD Madagascar, UPR 105, URP Forêts et Biodiversité, Tananarive, Madagascar

Abstract

Near infrared spectroscopy (NIRS) is based on the radiation absorption principle by the organic matter between 700-2500 nm. This absorption is related to the chemical composition of samples, the latter can be estimated by simply measuring the absorption by the sample. This measurement is done with a spectrometer by transmission (measuring the light passing through a thin or liquid sample) or reflexion (it measures the light reflected from a thick sample). NIRS requires a calibration step based on reference measurements obtained in the laboratory, and the establishment of predictive models. It has many applications in industry (chemical, pharmaceutical, agro-industries). This tool has been developed for quantitative variables and it is used also for qualitative approaches (ie type classification).

A separate communication has shown that it exists in *Ravensara aromatica*, a species endemic to Madagascar, 5 types corresponding to leaf chemistry characteristics: two belonging to the group characterized by aromatic molecules (methyl-chavicol, methyl-eugenol) and three of a group characterized by terpenic molecules (limonene, sabinene, α -terpinene). The question here is whether NIRS can identify these five chemical groups.

We measured the absorbance transmission of 100 samples of essential oils of known type. The mean spectra by type have characteristic absorbance peaks that make them easily identifiable. Thus, we show that on the sole basis of the spectral information, can discriminate the chemical types of oils. We also constructed a calibration for the amount of some chemical compounds, including the amount of Limonene.

Secondly, we recorded absorbance spectra of reflection on dry leaves with known chemical type. We were able to separate the types with terpene compounds and aromatic structures although it was more difficult. For the latter, we distinguish the chemotypes with methyl-chavicol and those with methyl-eugenol. We validated these models on independent samples.

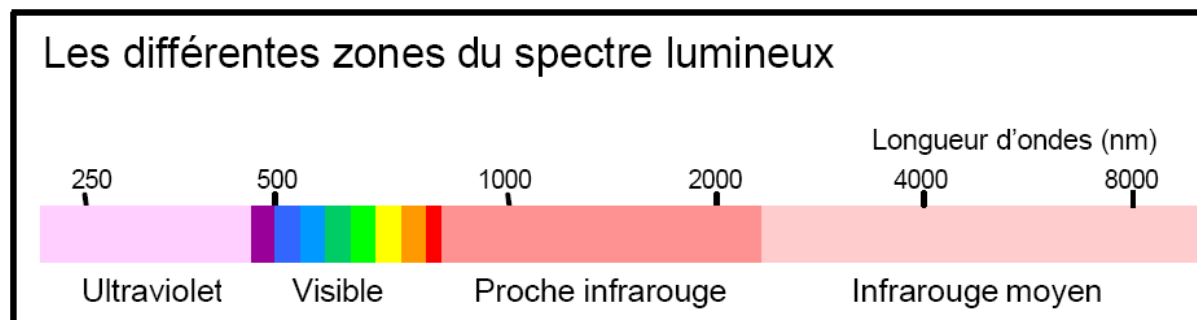
These results offer perspectives for early and rapid detection of chemical types on *Ravensara aromatica*. Apparatus dedicated to NIRS exist now in a portable version, and as part of production zone management, we can consider identifying the chemical types of trees of a specific ecotypes to improve the quality of the production.

1. Introduction

1.1 La spectrométrie proche infra rouge

Conventionnellement les limites du proche infrarouge se situent entre 800 et 2500 nm (figure 1)

Figure 1 : Position de la zone du PIR dans le spectre lumineux



La spectrométrie dans le proche infrarouge (SPIR) est une technique analytique basée sur le principe d'absorption des rayonnements (infrarouges) par la matière organique. La méthode s'intéresse aux liaisons chimiques spécifiques des constituants : O-H, N-H, C-H, C-C, ... Les liaisons chimiques se comportent comme des oscillateurs vibrant en permanence à des fréquences différentes en fonction de leur nature. Une liaison chimique particulière peut absorber une radiation PIR dont la fréquence est égale à sa fréquence de vibration et ainsi passer d'un état fondamental à un état excité. On parle d'harmoniques lorsque, les fréquences de l'énergie des radiations sont des multiples entiers de la fréquence fondamentale. On parle de combinaison quand elles sont le résultat de plusieurs liaisons dont les vibrations se chevauchent. Dans la zone du proche infrarouge, les absorptions ne sont pas dues aux vibrations fondamentales des molécules, mais aux vibrations harmoniques et aux vibrations de combinaisons (Bertrand 2002).

Cette absorption étant liée à la composition chimique des échantillons, on peut estimer cette dernière par la simple mesure de l'absorption de lumière par l'échantillon. Cette mesure se fait avec un spectromètre soit en « transmission » (on mesure la lumière traversant un échantillon fin), soit en « réflexion » (on mesure la lumière réfléchie par un échantillon épais).

La SPIR nécessite cependant une phase d'étalonnage (ou « calibration ») basée sur des mesures de référence obtenues au laboratoire (composition chimique, valeur alimentaire, etc.) et l'établissement des modèles mathématiques qui permettront de relier le spectre infrarouge au résultat de ces mesures. La SPIR a un grand nombre d'applications dans le domaine industriel (chimie, pharmacie, agro-industries).

Au Cirad elle est utilisée essentiellement pour estimer la composition chimique d'échantillons de toute sorte et application (domaine animal : qualités fourragères, analyse de fèces ; domaine alimentaire : dosages en protéines, acides gras, sucres dans les aliments, composés spécifiques - exemple caféine - ; domaine forestier : composition chimique du bois, éléments minéraux, huiles essentielles ...).

Cette technique a de nombreux avantages :

- Elle est rapide : quelques minutes suffisent pour recueillir le spectre d'absorption d'un échantillon, qui servira à la prédiction de sa composition. A comparer avec la très longue durée d'une analyse de composition chimique (plusieurs jours) !

- Elle est non destructive : l'échantillon est récupéré intact après analyse. Cette propriété est particulièrement importante pour des échantillons très peu abondants ou que l'on doit conserver pour des analyses ultérieures
- Elle ne nécessite pas une grande quantité d'échantillon : classiquement 4 à 5 grammes suffisent ! Dans certaines conditions on peut même réaliser des spectres sur des quantités extrêmement faibles : moins d'un gramme d'échantillon voire une graine unique (ce qui est utile dans des études de génétique des plantes). La principale limite à la réduction des quantités est l'obtention d'un échantillon représentatif du produit à analyser (aliment, fourrage, bois, etc.).
- Analyse multiparamétrique : possibilité de déterminer simultanément plusieurs caractères à partir d'un seul spectre
- Elle est peu onéreuse : hormis l'investissement initial dans l'appareil et la constitution des «calibrations» pour chaque produit, le coût de passage des échantillons est très faible. Il faut simplement prévoir quelques analyses de référence au laboratoire pour vérifier que la calibration reste correcte au cours du temps et bien adaptée aux nouveaux échantillons. On pratique généralement environ 10% de telles analyses de contrôle.
- Faible coût de fonctionnement : aucun consommable n'est nécessaire pour l'analyse, ce qui amortit rapidement l'investissement.

Cependant, elle présente certaines limites et contraintes :

- Difficultés pour l'interprétation des spectres et besoin d'étalonnage (analyse directe très difficile en général), ce qui nécessite une grande rigueur et des compétences (des connaissances en informatique et statistique sont indispensables pour le traitement des données et l'interprétation des résultats).
- Problèmes de transfert de calibration d'un appareil à l'autre.
- SPIR ne peut généralement pas être utilisée pour estimer les substances minérales, puisqu'elle est basée sur l'absorption du rayonnement par les molécules organiques.
- Que dans la plupart des cas les substances présentes à l'état de traces dans les échantillons ne peuvent pas être prédites par la technique car le signal leur correspondant est trop faible.

1.2 Méthodes de traitement des données SPIR : la chimiométrie

Lors de la réalisation d'une acquisition par SPIR, des spectres sont enregistrés sous la forme d'une matrice (en colonne les absorbance aux différentes longueurs d'onde, en ligne les échantillons). Les spectromètres PIR sont capables d'effectuer simultanément un grand nombre de mesures aux différentes longueurs d'onde et ce en quelques secondes. L'information du spectre d'absorption recueilli est complexe, difficile à extraire sans moyen informatique et de plus les bandes d'absorption de toutes les liaisons chimiques concernées se chevauchent.

L'interprétation du spectre est donc de fait très difficile. C'est pourquoi des méthodes chimiométriques (procédés mathématiques et statistiques) sont appliquées afin d'extraire les informations pertinentes des spectres et de mettre au point des méthodes efficaces d'étalonnage. Les applications analytiques de la SPIR consistent ainsi en une exploitation des données spectrales pour prédire la valeur d'une variable quantitative ou pour classer des groupes ou des classes.

Les notions chimiométriques utilisées sont très souvent:

- l'analyse en composantes principales (ACP)
- la régression sur composantes principales (PCR)
- ainsi que la régression basée sur les moindres carrés partiels (PLS 1 pour une variable Y et PLS 2 pour plusieurs variables Y analysées simultanément)

Pour les analyses discriminantes permettant non pas de quantifier mais de classer, il existe deux méthodes principales :

- SIMCA (Soft Independent Modeling of Class Analogy) non utilisée ici,
- PLS-DA (Partial Least Square-Discriminant Analysis).

Cette dernière se base sur une méthode PLS (régression basée sur les moindres carrés partiels) traitent des variables codifiées en 0 et 1. Si une variable de classification comporte 4 options par exemple, 4 nouvelles variables codifiées en 0 et 1 sont créées et seront analysées simultanément par une régression PLS 2. Ainsi 4 modèles de prédiction sont construits et chacun estimera la classe d'appartenance (+/- 0 : n'appartient pas, +/- 1 : appartient).

Cinq principales étapes sont indispensables dans la démarche de l'analyse quantitative mettant en jeu une méthode en SPIR :

- Sélection des échantillons représentatifs du plan d'expérience
- Mesure des spectres des échantillons sélectionnés
- Mesure de laboratoire
- Etalonnage (mettre en relation une valeur Y de référence avec des mesures en SPIR)
- Validation sur échantillons indépendants
- Prédiction sur nouveaux échantillons

Les différentes étapes d'une application qualitative en SPIR

- Sélection des échantillons représentatifs du plan d'expérience
- Mesure des spectres des échantillons sélectionnés
- Mesure de laboratoire / détermination des types ou des classes
- Etalonnage (mettre en relation les classes avec les empreintes spectrales NIRS)
- Validation sur échantillons indépendants
- Prédiction sur nouveaux échantillons

Les caractéristiques statistiques d'un modèle de calibration sont le RMSEC (écart-type résiduel de la calibration), le nombre de termes (nombre de variables ou composantes de l'équation de calibration) et le R^2 (Coefficient de détermination) qui sont des indices de la précision des calibrations et de l'ajustement des données. Un « bon » modèle de calibration a un RMSEC se rapprochant de la répétabilité de l'analyse de référence.

L'évaluation du modèle durant la validation se base sur le RMSECV (Ecart type résiduel de la « validation croisée ») et le RMSEP (Ecart type résiduel de la prédiction). Ce sont des indications de la précision avec laquelle le modèle de calibration pourra prédire de nouveaux échantillons. La différence est que le RMSECV mesure cette capacité sur des échantillons de la population d'établissement de la calibration tandis que RMSEP la mesure sur des échantillons totalement nouveaux. Ces deux paramètres doivent avoir les valeurs les plus proches possible de la répétabilité de l'analyse de référence.

Le choix de telle ou telle méthode dépend du nombre d'échantillons disponibles, la première sera retenue si celui-ci n'est pas important (<60-80), et de la distribution des échantillons le long du gradient du caractère considéré.

Pour évaluer la performance des modèles PLS de prédiction quantitative, le RPD (ratio performance / déviation) est le rapport entre la variabilité de la population (écart-type) et la précision de la calibration (RMSECV ou RMSEP). Ce rapport est donc une indication de l'information apportée par le modèle. On considère souvent qu'un modèle est intéressant à partir de $RPD=3-4$, très bon au-delà de 6, au-delà de 12 le modèle PLS peut remplacer la méthode de référence. Mais ce jugement doit tenir compte de la variabilité de la population de base et de la précision de la mesure de référence.

1.3 Problématique de l'étude sur le *Ravensara aromatica*

Nous rappelons l'existence de 3 chémotypes principaux, dominés respectivement par le méthyl chavicol, le méthyl eugénol et le dernier par des structures monoterpéniques. Dans le dernier groupe d'individus, 3 classes chimiques se singularisent, caractérisées par des taux prépondérants de sabinène, d' α -terpinène ou de limonène (Andrianoelisoa et al., 2006, 2010).

La proportion de méthyl chavicol est préjudiciable à la valeur des huiles essentielles de *Ravensara aromatica*. Comme chaque arbre produit un type chimique et un seul, il est nécessaire de détecter les arbres qui produisent pas ou peu de méthyl chavicol.

Les méthodes d'identification dépendent du stade de détection que ce soit au champ, avant la distillation ou après. Après la distillation, l'identification passe par l'analyse en chromatographie des huiles nécessitant de l'équipement et des compétences. Avant la distillation, il n'existe pas de méthode d'identification par la morphologie de l'arbre et des feuilles et la répartition dans les terroirs malgaches est aléatoire. En conséquence, il n'existe que la méthode de « sniffing » pour détecter les types chimiques des arbres au champ et avant la distillation. Méthodologie simple mais qui nécessite une formation permanente et qui n'est pas garantie à 100%. Nous proposons ici d'évaluer les possibilités de réaliser cette détection au moyen de la SPIR à deux stades, huiles essentielles et feuilles de *Ravensara aromatica* et d'estimer la concentration de certaines molécules dans ces huiles.

2 Matériels et méthodes

2.1 Origine des échantillons pour l'analyse SPIR

L'échantillonnage est constitué de 150 arbres dont les feuilles ont été récoltées arbre par arbre dans trois sites d'étude (Didy, Raboana, Nosibe an'Ala). Ensuite, chaque lot de feuilles a été distillé séparément. Les huiles essentielles obtenues ont été analysées séparément par chromatographie en phase gazeuse et CPG-SM.

Pour chaque lot, quelques feuilles séchées (une dizaine) sont conservées dans un sachet hermétiquement fermé. Arrivés au laboratoire du Cirad à Montpellier. Les feuilles sont placées au moins 48h avant l'analyse dans une chambre climatisée contrôlée à 55% d'humidité relative afin que la teneur en eau des échantillons soit homogène.

2.2 Mesures SPIR

L'analyse SPIR a été réalisée par transmittance pour les huiles. Elles ont été placées dans des tubes en quartz adaptés au spectromètre Bruker MPA équipé d'un module de transmission. Le spectre obtenu est la moyenne de 16 scans. Cent échantillons disponibles d'huiles essentielles ont été analysés par SPIR, y compris un échantillon d'huile essentielle de Ravintsara.

L'acquisition des spectres PIR pour les feuilles a été réalisée par réflectance par un spectromètre Bruker Vector 22/N équipé d'une sphère d'intégration. Le spectre obtenu pour les feuilles représente la moyenne de 32 scans enregistrés. Les échantillons de feuilles (150 lots) sont directement posés (partie inférieure) sur la lentille de mesure du spectromètre PIR. Trois feuilles par lot et 3 spectres par feuille ont été mesurés et ensuite moyennés.

Quelque soit l'appareil, l'acquisition des spectres est réalisée sur la gamme 12500-4000cm⁻¹ (800-2850nm) avec un pas de 8cm⁻¹ (ou 0,4nm).

2.3 Analyses chimiométrique

Les spectres PIR ont été utilisés pour la modélisation et la classification des données. L'étalonnage est réalisé par le logiciel Unscrambler v. 9.7 (Camo, AS, Norway). La transformation (ou prétraitement des spectres) est réalisée en vue d'éliminer l'information physique de l'information chimique et d'obtenir le minimum d'erreurs de prédiction et/ou le taux de classification le plus efficace. Les différents types de prétraitement utilisés sont : la correction SNV (standard normal variate) et les dérivations :

- La méthode SNV permet de corriger à la fois un facteur de hauteur des spectres et un facteur d'intensité. La correction SNV consiste à retrancher de chaque mesure la moyenne du spectre et à le diviser par son propre écart-type.
- La dérivation des spectres réduit les effets de variation incontrôlée de la ligne de base, et augmente la résolution du nombre de pics.

Les modèles PLS ont été testés soit par validation croisée (une partie des échantillons - un cinquième - est écarté de la construction des modèles et sera utilisée pour tester le modèle et ce de manière itérative) soit par la validation indépendante, le modèle est construit et testé par validation croisée et ensuite validé par la prédiction des échantillons indépendants.

3. Résultats et discussions

3.1 Analyses des données spectrales acquises sur les huiles

Analyses des spectres PIR

Nous avons comparé l'observation des spectres des échantillons de *Ravensara aromatica* et un échantillon de Ravintsara, qui est souvent source de confusion dans le commerce et qui n'a pas les mêmes propriétés. L'observation des spectres dans la figure 2 montre, un profil spectral bien différent pour le Ravintsara. Nous identifions 6 pics d'absorbance caractéristiques pour le Ravintsara (8404, 7197, 7251, 5708, 5854, 5889 cm^{-1}). Il convient de vérifier ceci avec un plus grand nombre d'échantillons, mais ce type de résultats nous permet de croire qu'il est relativement facile de distinguer les huiles des deux espèces.

Si l'on compare uniquement les spectres moyens des 5 types chimiques de *Ravensara aromatica* (Figure 3), on observe bien deux groupes correspondants aux deux chémotypes caractérisés l'un par des molécules aromatiques (méthyl chavicol, méthyl eugénol) et l'autre par des molécules terpéniques (limonène, sabinène, α -terpinène).

Analyses des données spectrales des huiles par ACP

L'analyse en composantes des données spectrales recueillies sur les huiles révèlent aisément, sur les deux premières composantes principales, les 3 groupes : méthyl chavicol, méthyl eugénol et terpéniques (Figure 3). Parmi les terpéniques, les types à Limonène se distinguent des deux autres (sabinène et α -terpinène).

Figure 2 Comparaison des spectres moyens de Ravintsara et de *Ravensara aromatica* (5 types chimiques)

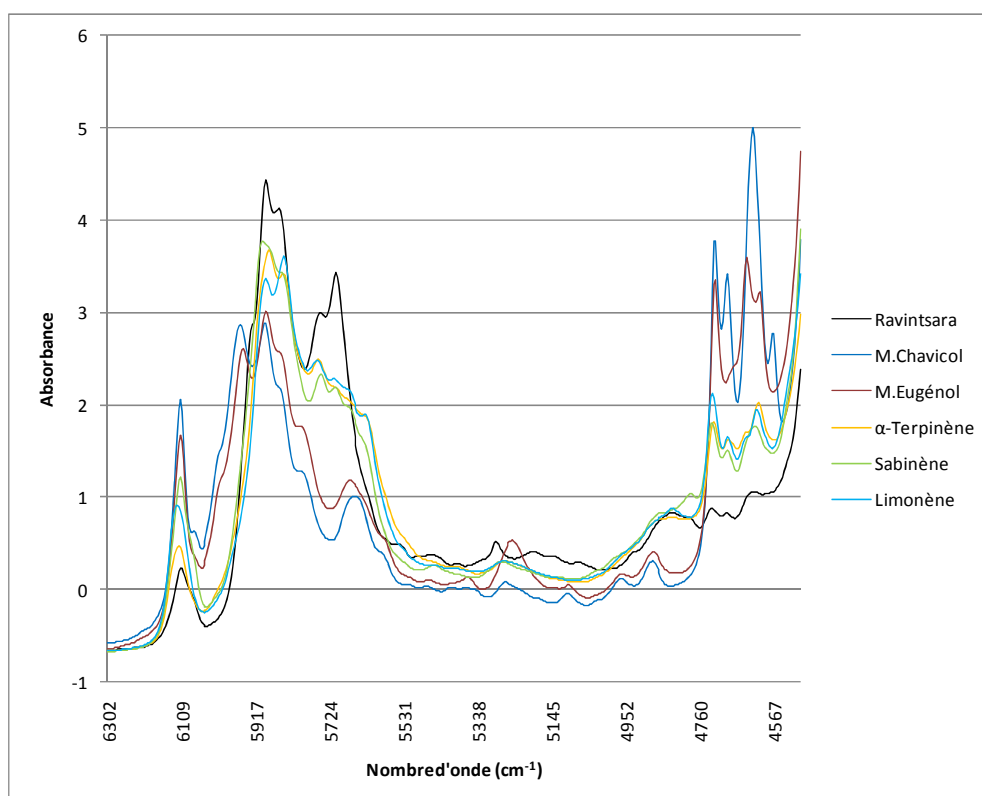
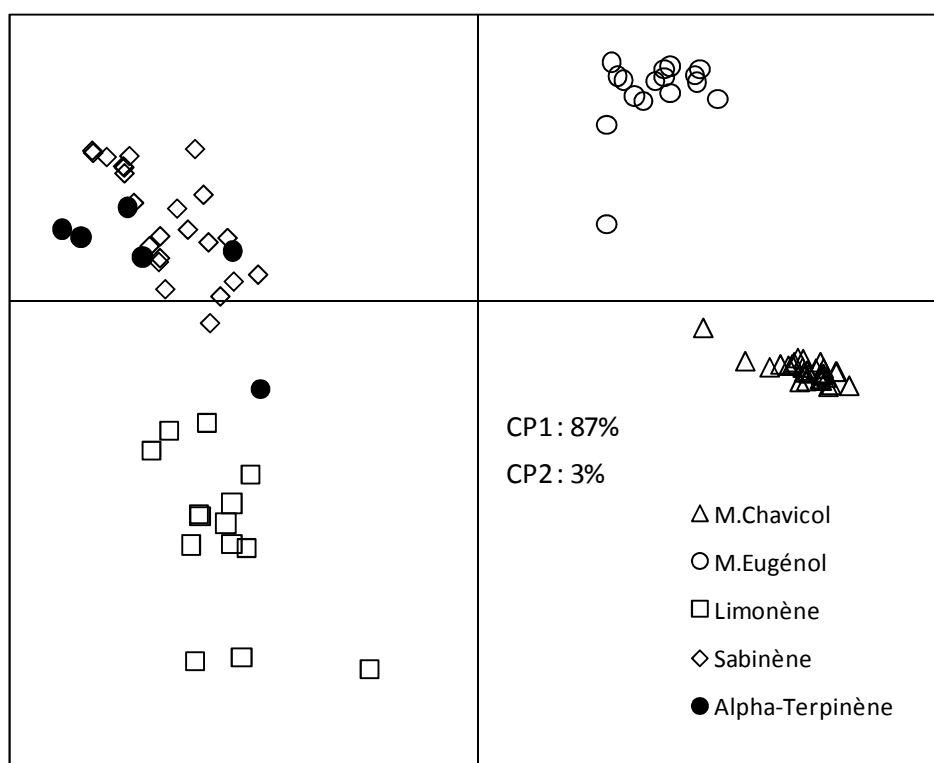


Figure 3 : Score des échantillons d'huiles de l'analyse en composantes principales des données spectrales d'huiles de *Ravensara aromatica* sur les composantes 1 et 2.



Résultats de prédiction PLS pour certains composés

Nous avons réalisé une calibration PLS pour différents composés. Nous présentons ici les résultats pour limonène et α -terpinène. Ces modèles ont été validés par validation croisée permettant d'estimer leur efficacité dans la prédiction. Les figures 4 et 5 montrent les résultats de cette validation croisée et comparent les valeurs mesurées et les valeurs prédites par les modèles PLS.

Les coefficients de détermination (R^2) entre ces deux séries de données sont égaux à 0,98 et 0,93 respectivement pour le limonène et l' α -terpinène. Les erreurs de prédiction sont de $\pm 4,6\%$ ($2 \times \text{RMSECV}$) et $\pm 1,3\%$. Et les RPD de 7,4 et 3,9, démontrent l'efficacité de ces modèles pour les prédictions de ces composés dans les huiles essentielles de *Ravensara aromatica*.

Afin de disposer de modèles de prédiction pour les molécules les plus importantes, il faudrait augmenter le nombre d'échantillons. Un modèle sera d'autant plus performant que la variabilité des propriétés d'intérêt est bien représentative et bien équilibrée (en nombre d'échantillons) le long du gradient. Pour le méthyl chavicol et le méthyl eugénol, il faudrait réaliser des mélanges d'huiles afin de créer artificiellement des échantillons intermédiaires pour obtenir une gamme bien répartie entre les valeurs extrêmes trouvées naturellement. Et ce d'autant que les huiles commercialisées en amont sont des mélanges et que les taux intermédiaires de ces molécules n'existent pas individuellement (au niveau arbre).

Figure 4 : Comparaison des valeurs mesurées et valeurs prédites pour le limonène par le modèle PLS sur les données spectrales mesurées sur les huiles de *Ravensara aromatica*.

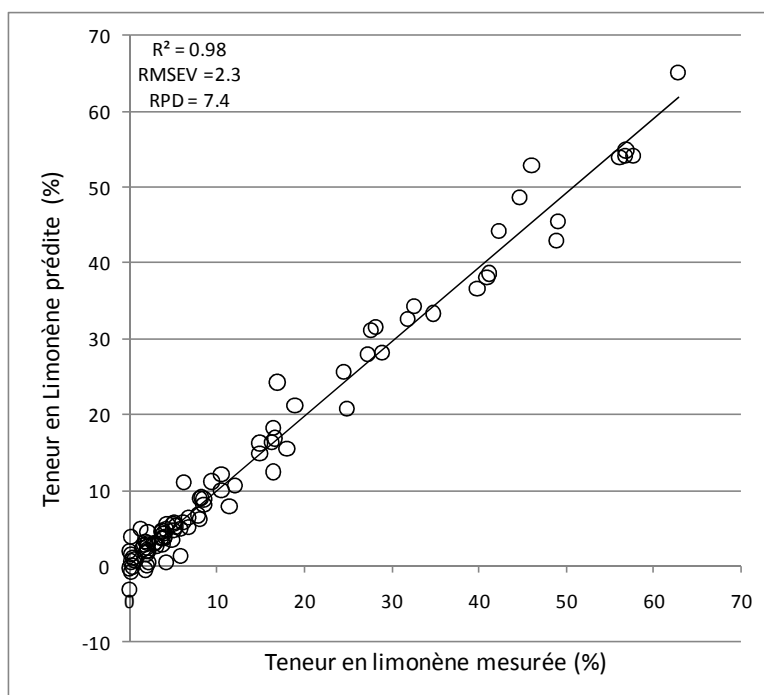
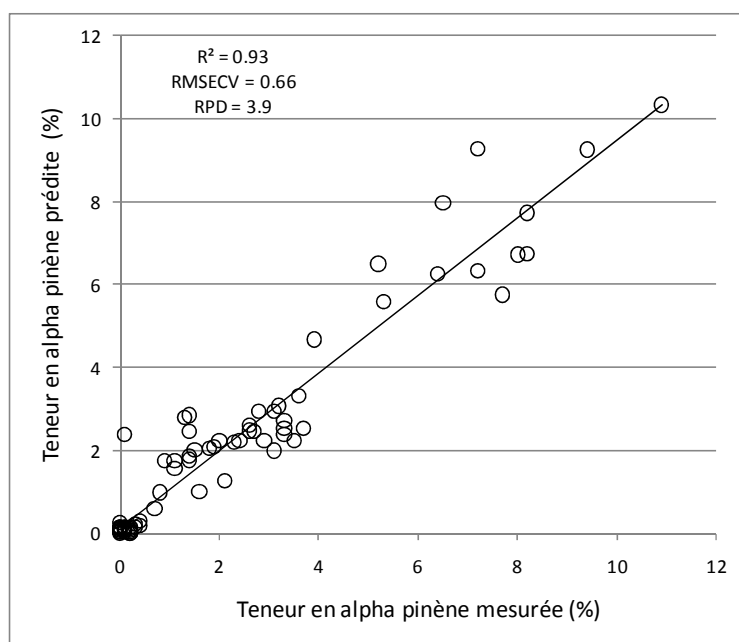


Figure 5 : Comparaison des valeurs mesurées et valeurs prédites pour l' α -terpinène par le modèle PLS sur les données spectrales mesurées sur les huiles de *Ravensara aromatica*.

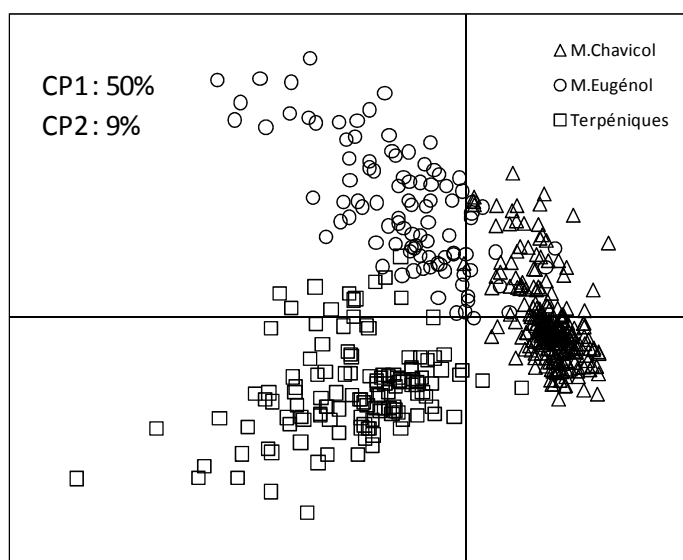


3.2 Analyses des données spectrales acquises sur les feuilles de *Ravensara aromatica*

Analyse des données spectrales par ACP

La Figure 6 présente les résultats de l'analyse en composantes principales des spectres moyens des 450 feuilles (soit 150 arbres) réparties dans 3 classes chimiques. Les deux premières correspondent au chémotype à méthyl chavicol (triangle) et au méthyl eugénol (rond). La distinction des données spectrales des feuilles renfermant principalement de l' α -terpinène, du sabinène ou du limonène, dans trois classes distinctes n'a pas été résolue. Elles sont regroupées dans une classe unique, à composés terpéniques (carré).

Figure 6 : Scores des échantillons de feuille de l'analyse en composantes principales des données spectrales des feuilles de *Ravensara aromatica* sur les composantes 1 et 2.



Classification par PLS-DA

Nous avons divisé au hasard les lots de spectres de feuilles, soit 300 pour construire les modèles et un autre sous ensemble (150 spectres) pour valider les modèles. Le tableau 1 présente les résultats de la validation des modèles PLS-DA pour les 3 chémotypes.

Certaines feuilles d'une classe donnée sont affectées à des classes différentes des vraies. Trois échantillons méthyl chavicol sont difficiles à classer dans le bon groupe soit un taux d'erreur de 2% et quatre échantillons méthyl eugénol sont difficiles à classer dans le bon groupe soit un taux d'erreur de 2,7%. Tous les individus à composés terpéniques sont par contre bien classés (tableau 1). Sur la base des modèles PLS-DA et pour une validation totalement indépendante nous avons prédit la classe de nouveaux échantillons récoltés l'année suivante sur des arbres dont le type était connu. Le résultat des 3 modèles correspondant aux trois types chimiques et leur combinaison ont permis de classer correctement 100 % des échantillons testés.

Tableau 1 : Résultats de la validation indépendante des modèles PLS-DA pour la prédiction des trois types chimiques méthyl chavicol, méthyl eugénol

	Méthyl Chavicol	Méthyl Eugénol	Terpénique	Nombre erreurs	Taux erreur
Méthyl chavicol	148	-	-	2	1.4%
Méthyl Eugénol	-	147	-	4	2.7%
Terpéniques	-	-	150	0	0%

4. Conclusions

En conséquence, notre étude démontre les potentialités d'usage de l'approche SPIR pour détecter les types chimiques de *Ravensara aromatica* à partir de l'information spectrale acquise sur les huiles comme sur les feuilles sèches. A partir des spectres mesurés sur les huiles, nous avons également pu construite des modèles nous permettant de prédire la valeur de certaines molécules d'intérêt.

Une utilisation de cet outil en routine nécessiterait au préalable, bien sûr, de réaliser un travail plus complet en augmentant le nombre d'échantillons par types chimiques. Avec l'arrivée de spectromètre portable, ce type d'outil avec au préalable une étude complète de modélisation, permettrait de pouvoir détecter au champ efficacement les types chimiques et de pouvoir organiser le terroir en sélectionnant les arbres intéressants pour tel ou tel type de formulation.

Remerciements

Ce travail est une partie de la thèse de Mme Andrianoelisoa. Nous tenons à remercier la société Bruker pour le prêt du spectromètre MPA. Nos remerciements vont également à tous les collecteurs de terrain et aux agents de laboratoire ayant réalisé les distillations.

Références

Andrianoelisoa H.S., Menut C., Collas de Chatelperron P., Saracco J., Ramanoelina P., Danthu P. 2006 Intraspecific chemical variability and highlighting of chemotypes of leaf essential oils from *Ravensara aromatica* Sonnerat, a tree endemic to Madagascar. Flav. Frag. J. 21: 833-838.
Andrianoelisoa H.S., Menut C., Collas de Chatelperron P., Ramanoelina P., Raobelison F., Danthu P. 2010 Chemical composition of essential oils in bark and leaves of individual trees of *Ravensara aromatica*. J. Ess. Oil Res. 22: 66-70.
Bertrand D., et Dufour E., 2000. La spectroscopie infrarouge et ses applications analytiques. TEC & DOC, collection STAA.